



شیمی و مهندسی شیمی

تهران - بهمن ۱۳۹۷

مطالعه و بررسی جذب ایوبیروفن روی سطح گرافن اکسید براساس تئوری تابعی چگال

جیران عرب^۱، ابوالقاسم شاملی^{۲*}

۱- کارشناسی ارشد شیمی دارویی، دانشگاه آزاد واحد علوم پزشکی تهران، دانشکده شیمی دارویی، گروه شیمی دارویی

۲- استادیار شیمی آلی، دانشگاه آزاد واحد امیدیه، دانشکده علوم پایه، گروه شیمی

خلاصه :

امروزه بیشترین تحقیقات در زمینه توده های سرطانی مربوط به رسانش دارو به سلول هدف و اثر درمانی آن بر روی توده های سرطانی می باشد و بیشتر بر پایه روش های هدف گیری و تثبیت نانو ذره در محل استوار است. از آنجا که تزریق مستقیم این داروهای هدفمند، عوارض جانبی بسیاری از جمله آسیب به سیستم عصبی را به دنبال دارد لذا بررسی محاسباتی امکان رهايش کنترل شده آن به وسیله نانو صفحات گرافن اهمیت به سزایی دارا می باشد. در این تحقیق (بر اساس مناسب ترین روش محاسباتی)، جذب داروی ایوبیروفن بر روی نانو صفحه گرافن بدون اغتشاش و نیز نانو صفحات گرافن با اغتشاشات اکسیژن (O) و هیدروکسید (OH) مورد مطالعه و بررسی شده است. بهترین روش، تئوری تابعیت چگالی با مجموعه پایه B3LYP و زیر پایه ۶-۳۱G و با تابع قطبش پذیر d می باشد. در ضمن به بررسی اثرات پارامترهای مختلف از قبیل دانسیته حالت، انرژی جذب، خصوصیات ساختاری و اوربیتال های پیوند طبیعی بر اساس روش پایدار بدست آمده است. بر اساس مطالعه انجام شده این نتیجه حاصل می شود که خصوصیات شیمیایی ساختارها، وابستگی زیادی به محیط الکترونی اطراف هسته ی اتم های سازنده دارد.

کلمات کلیدی: ایوبیروفن، دانسیته حالت، داروی هدفمند، تئوری تابعیت چگال، گرافن.

۱. مقدمه

یکی از چالش های اصلی دارورسانی، توزیع دارو در بدن می باشد به گونه ای که کمترین آسیب به سایر بافت ها برساند و بیشترین اثر گذاری در بافت مورد نظر حاصل شود. دارو رسانی نوین با تکیه بر علوم مختلف از جمله دارو سازی، زیست شناسی، شیمی و آنالیز ریاضی که قسمتی از دارو رسانی هدفمند محقق شده است و همچنین بر پایه فناوری نانو گام های مهمی را در جهت اجرای دارو رسانی هدفمند برداشته شده است [۱].

به منظور بهبود خواص دارویی و درمانی داروهای مورد استفاده در بیماران با استفاده از سیستم های انتقال دارو^۲ (DDS) ایجاد می شود و غالباً به صورت یک مخزن، دارو را همراه خود دارند. این سیستم ها، دارو را به مقدار معین و در

¹ Email: shameli678@gmail.com

² Drug Delivery Systems